

# Herleitung der Porous Medium Equation mit Hilfe der Modelleierung durch interagierende Vielteilchensysteme

Felix Lucka  
felix.lucka@gmx.net

4. November 2008  
Seminar "Nichtlineare Diffusion"  
WWU Münster  
WS08/09

## 1 Einleitung und Konzepte

- Beschreibung von Vielteilchensystemem auf unterschiedlichen Skalen
- Euler vs. Lagrange
- Ziel des Vortrags

## 2 Modell und Herleitung

- Modell eines Vielteilchensystems zur Beschreibung von Populationsdynamik
- Simulation
- Herleitung des Grenzwertes für  $N \rightarrow \infty$

## 3 Verallgemeinerungen/Ausblick

## 4 Zusammenfassung

Physikalische Systeme lassen sich auf makroskopischen Skalen oft durch einige wenige charakteristische Größen wie z.B. Temperatur, Konzentration, Druck, etc. beschreiben.

Die Zusammenhänge zwischen diesen Größen, sowie deren zeitliche Evolution werden oft durch **empirisch** gewonnene Gesetze beschrieben, die sich als partielle Differentialgleichungen formulieren lassen.

Die verallgemeinerte Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \nabla \cdot (D(\rho, x, t) \cdot \nabla \rho) \quad (1)$$

beschreibt beispielsweise die zeitliche Evolution einer makroskopischen Größe  $\rho$  (z.B. chem. Konzentration) unter dem Einfluss von Diffusion. ( $\rightarrow$  *Herleitung*)

Dabei werden diese Größen als **kontinuierlich** angenommen, so beschreibt  $\rho(x, t)$  als Lsg von (1) die raumzeitliche Dichte eines als Kontinuum angenommen Mediums (z.B. Flüssigkeit).

Diese Abstraktion steht im **Widerspruch** zum atomistischen Aufbau der Materie.

Zur Erklärung vieler Prozesse müssen jedoch die **individuellen** Eigenschaften der Materiepartikel berücksichtigt werden, wie z.B. Geschwindigkeit, Form, elektrische Ladung, etc.

Die Modellierung dieser Prozesse kann durch die direkte Beschreibung der Interaktion einzelner Partikel auf mikroskopischen Skalen erfolgen.

Dabei betrachtet man gewöhnlich eine fixe Anzahl von Partikeln, und modelliert die Interaktion dieser mit der restlichen Umgebung durch Felder (deterministisch) und/oder die Hinzunahme stochastischer Prozesse.

Mathematisch erfolgt die Beschreibung eines Systems aus  $N$  interagierenden Teilchen mithilfe eines Systems aus  $N$  gekoppelten stochastischen Differentialgleichungen (“SDEs”)

- Unter Physikern geläufig ist die Notation in Form einer sog. *Langevin*-Gleichung geläufig:

$$\frac{d}{dt}x_i(t) = f_{\text{ext}}(x_i, t) + \sum_{j=1}^N f_{i,j}(x_i, x_j, t) + \gamma_i(t)$$

+ Annahmen über die stochastische Kraft  $\gamma_i(t)$

- Unter Mathematikern ist die Notation in der Differentialschreibweise geläufiger:

$$dX_i(t) = a_i(X, t)dt + b_i(X, t)dB_t, \quad X = (X_1, \dots, X_N)$$

Nachteil: Nur Aussagen über Mittelwerte möglich, bzw. über die zeitliche Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichte (sog. *Fokker-Planck*-Gleichung)

## Gegenüberstellung der Konzepte

Bezeichnung	Euler'sche Perspektive	Lagrange'sche Perspektive
Skala	makroskopisch	mikroskopisch
Freiheitsgrade	wenige, das gesamte System beschreibende Größen	sehr viele, individuelle Komponenten beschreibende Größen
Mathematische Beschreibung	PDEs (deterministisch)	SDEs (stochastisch)

Je nach Problemstellung kann die eine oder die andere Betrachtungsweise hilfreich, bzw. experimentell besser zugänglich sein.

Elementarer ist die Beschreibung auf mikroskopischer Skala.

Eine **konsistente** Theorie mikroskopischer Wechselwirkungen muss sich daher in die entsprechende makroskopische Beschreibung überführen lassen, dabei muss insbesondere die Stochastizität im Limes verschwinden, bzw. in Mittelwerte übergehen!

## Ziel:

Wir stellen ein Modell zur Populationsdynamik vor, das auf  $N$  interagierenden Teilchen basiert, und zeigen, dass die Dynamik sich im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  durch eine durch eine PDE für die Populationsdichte beschreiben lässt, in dem ein Term dem Diffusionsterm in der PME entspricht.

Dabei werden wir hier den Fokus auf die Modellierung und die Konzepte legen, und zur Veranschaulichung eine Simulation verwenden.

Wir betrachten  $N$  Individuen einer schwarmbildenden Population, deren Bewegung ausschließlich von folgenden drei Prozessen beeinflusst wird:

- 1 Der Trieb zur Schwarmbildung veranlasst einzelne Individuen sich mit anderen Individuen räumlich zu gruppieren, sofern sie diese wahrnehmen können.  
Diese Wechselwirkung soll **schwach und langreichweitig** sein.
- 2 Auf kurzen Distanzen stellt sich eine abstoßende Wechselwirkung zwischen einzelnen Individuen ein, die Gedränge verhindert.  
Diese Wechselwirkung soll **stark und kurzreichweitig** sein.
- 3 Zusätzlich unterliegen die Individuen einer **schwachen stochastischen** Bewegung, die sie nach anderen Artgenossen suchen lässt.

Mathematisch betrachten wir einen stochastischen Prozess

$$X_N(t) = (X_N^1(t), \dots, X_N^N(t)) \in (\mathbb{R}^d)^N$$

dessen zeitliche Evolution durch eine SDE der Form:

$$dX_N^k(t) = \left\{ \alpha F_{agg}^N [X_N(t)] + \gamma F_{rep}^N [X_N(t)] \right\} \left( X_N^k(t) \right) \cdot dt + \sigma_N \cdot dW^k(t)$$

mit:

- $k = 1, \dots, N$
- $F_{agg}^N, F_{rep}^N$ : Funktionale, die Aggregation und Repulsion modellieren, und auf normierten Potenzialen beruhen
- $\alpha, \gamma$ : Stärke der Aggregation, bzw. Repulsion
- $\sigma_N$ : Stärke der stochastischen Bewegung  $\left( \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_N = \sigma_\infty \geq 0 \right)$
- $dW^k$ :  $N$  unabhängige Wiener-Prozesse (*additive noise*)

gegeben ist.

## Exkurs: Wiener-Prozess

Ein *Wiener-Prozess* (oder *Brownsche Bewegung*)  $W(t) := W_t$  ist ein spezieller zeitstetiger stochastischer Prozess.

Man kann ihn sich am Besten als speziell skalierten Limes eines einfachen *random walks* vorstellen.

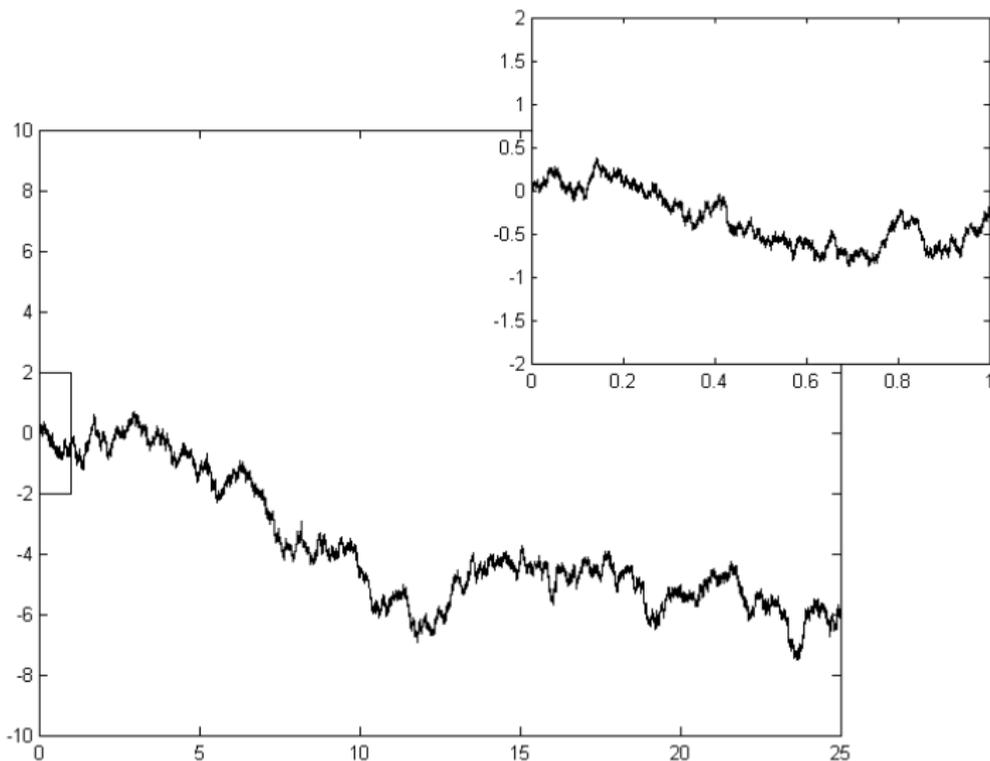
Er ist durch drei Eigenschaften eindeutig charakterisiert:

- 1  $W_0 = 0$
- 2  $W_t$  ist fast sicher stetig
- 3  $W_t$  hat stochastisch unabhängige Zuwächse die gaussverteilt sind gemäß:  
 $W_t - W_s \sim \mathcal{N}(0, t - s)$

Er ist stetig, aber fast sicher nirgendwo differenzierbar, skaleninvariant ( $\alpha^{-1}W_{\alpha^2 t}$  ist ebenfalls ein Wienerprozess für  $\alpha > 0$ ) und besitzt als infinitesimalen Generator  $\frac{1}{2}\Delta$



## Modell eines Vielteilchensystems zur Beschreibung von Populationsdynamik



Mathematisch betrachten wir einen stochastischen Prozess

$$X_N(t) = (X_N^1(t), \dots, X_N^N(t)) \in (\mathbb{R}^d)^N$$

dessen zeitliche Evolution durch eine SDE der Form:

$$dX_N^k(t) = \left\{ \alpha F_{agg}^N [X_N(t)] + \gamma F_{rep}^N [X_N(t)] \right\} \left( X_N^k(t) \right) \cdot dt + \sigma_N \cdot dW^k(t)$$

mit:

- $k = 1, \dots, N$
- $F_{agg}^N, F_{rep}^N$ : Funktionale, die Aggregation und Repulsion modellieren, und auf normierten Potenzialen beruhen
- $\alpha, \gamma$ : Stärke der Aggregation, bzw. Repulsion
- $\sigma_N$ : Stärke der stochastischen Bewegung  $\left( \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_N = \sigma_\infty \geq 0 \right)$
- $dW^k$ :  $N$  unabhängige Wiener-Prozesse (*additive noise*)

gegeben ist.

Die Interaktion zwischen zwei Teilchen wird klassisch durch den Gradienten eines Wechselwirkungspotentials beschrieben. Wir wählen zur Modellierung hier folgenden Ansatz:

$V_1^a, V_1^r$  sind zwei normierte Potentiale mit kompakten Trägern  $[-R_a, R_a], [-R_r, R_r]$ ,  $R_r \ll R_a$

Daraus erhalten wir die Potentiale  $V_N^a, V_N^r$  per Skalierung:

$$V_N(z) = N^\beta V_1(N^{\beta/d} z), \quad \beta \in [0, 1]$$

Die WW zwischen zwei Teilchen wird dann durch  $\frac{1}{N} V_N(x - y)$  beschrieben

Abhängig von  $\beta$  ergeben sich verschiedene Typen von WW:

- 1  $\beta = 0$  : schwache makroskopische WW, Interaktion mit  $O(N)$  Nachbarn, stark abnehmend ( $O(1/N)$ ),  $\lim N \rightarrow \infty$  sog. *mean-field-limit*
- 2  $\beta = 1$  : starke mikroskopische WW, Interaktion mit  $O(1)$  Nachbarn, stark zunehmend ( $O(N)$ ),  $\lim N \rightarrow \infty$  sog. *hydrodynamic-limit*
- 3  $\beta \in (0, 1)$  : mittlere sog. *mesoskopische* WW, Interaktion mit  $O(N^{1-\beta})$  Nachbarn, Stärke ( $O(1/N^{1-\beta})$ )

Zusammenfassung:

Stochastischer Prozess:

$$X_N(t) = (X_N^1(t), \dots, X_N^N(t)) \in (\mathbb{R}^d)^N$$

Evolutionsgleichung:

$$dX_N^k(t) = \left\{ \alpha F_{agg}^N [X_N(t)] + \gamma F_{rep}^N [X_N(t)] \right\} (X_N^k(t)) \cdot dt + \sigma_N \cdot dW^k(t)$$

Interaktionsterme:

$$F_{agg}^N [X_N(t)] (X_N^k) = \frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N \nabla V_1^a (X_N^k - X_N^j)$$

$$F_{rep}^N [X_N(t)] (X_N^k) = -\frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N N^\beta \nabla V_1^r (N^{\beta/d} (X_N^k - X_N^j)), \quad \beta \in (0, 1)$$

In der Simulation wurden Potentiale bzw. deren Gradienten gewählt, die eine möglichst anschauliche Wirkung haben.

Der Repulsionsgradient ist ein Vektor in Richtung des anderen Teilchens, dessen Stärke abhängig vom Abstand durch eine stückweise lineare Funktion gegeben ist

Als Aggregationsterm wählen wir einen normierteren Vektor in Richtung des anderen Teilchens, falls sich dieses in Sichtweite befindet:

$$F_{agg}^N(\mathbf{X}_N^k) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(\mathbf{X}_N^k - \mathbf{X}_N^j)}{\|(\mathbf{X}_N^k - \mathbf{X}_N^j)\|} \cdot \mathbf{1}_{[0, aR]}(\|(\mathbf{X}_N^k - \mathbf{X}_N^j)\|_2)$$

## Exkurs: Numerische Lösung von SDEs

*“It may very well be said that the best way to understand SDEs is to work with their numerical solutions.”*

Zur numerische Lösung von SDEs der Form:

$$dX(t) = a(X, t)dt + b(X, t)dB_t, \quad X(0) \sim \zeta, \quad t \in [0, T]$$

benutzen wir hier das einfachste Verfahren, das sog *Euler-Maruyama Verfahren*. Dabei wird eine Realisierung der Lösung mit Hilfe von Zufallszahlengeneratoren numerisch ermittelt:

- Zeitintervall diskretisieren:  $\Delta t = T/N, t_i = i \cdot \Delta t, i = 1 \cdots N$
- $X(0)$  gemäß  $\zeta$  “ziehen“
- $X_{i+1} = X_i + a(X_i, t_i) \cdot \Delta t + b(X_i, t_i) \cdot \Delta W_i$ ,  
dabei ist  $\Delta W_i = (W(t_{i+1}) - W(t_i))$  gemäß  $\mathcal{N}(0, \Delta t)$  zu ziehen.

Aussagen über stochastische Größen, wie z.B. den Erwartungswert müssen empirisch durch Auswerten vieler einzelnen Realisierungen gewonnen werden.

Beispiel:

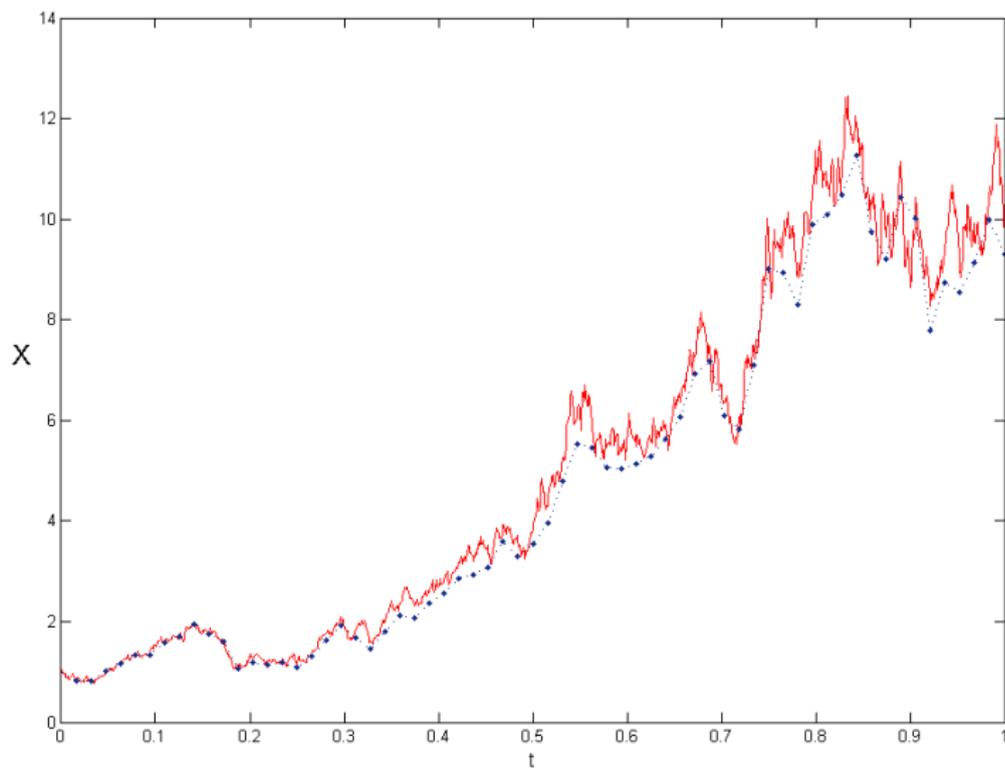
$$dX(t) = \lambda X(t) \cdot dt + \mu X(t) \cdot dW(t)$$

Exakte Lösung:

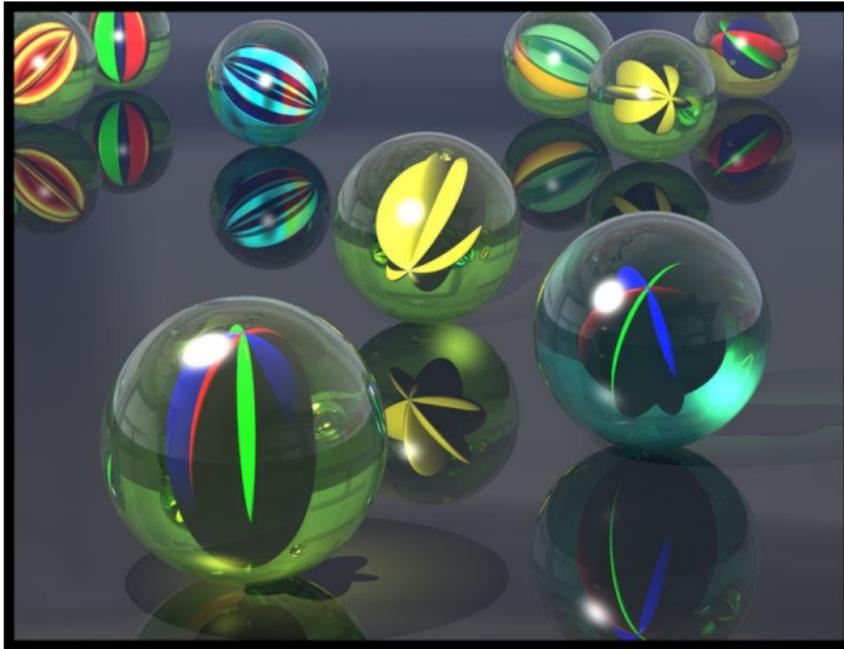
$$X(t) = X(0) \cdot \exp \left\{ \left( \lambda - \frac{1}{2} \mu^2 \right) t + \mu W(t) \right\}$$

numerische Integration:

$$\begin{aligned} X_{i+1} &= X_i + \lambda X_i \cdot \Delta t + \mu X_i \cdot (W(t_{i+1}) - W(t_i)) \\ (W(t_{i+1}) - W(t_i)) &= \sqrt{t_{i+1} - t_i} \cdot Y; \quad Y \sim \mathcal{N}(0, 1) \end{aligned}$$



## Simulation



Ziel ist es, aus der mikroskopischen Dynamik des  $N$ -Teilchensystems eine deterministische Beschreibung der Teilchendichte  $\rho(x, t)$  auf makroskopischer Ebene zu entwickeln.

Dazu definieren wir:

$$\delta_t^k(B) := \begin{cases} 1 & \text{falls } X_N^k(t) \in B \\ 0 & \text{falls } X_N^k(t) \notin B \end{cases}, B \subset \mathbb{R}^d$$

$$\epsilon_N(B, t) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta_t^k(B) = \frac{\# \text{ Teilchen in } B \text{ zur Zeit } t}{\# \text{ Gesamtteilchen}} \sim \text{rel. Teilchendichte}$$

Und nehmen an, dass  $\epsilon_N(x, t) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \rho(x, t) \cdot d\lambda(x)$  schwach konvergiert.

Wir werden die Konvergenz gegen eine schwache Lösung einer PDG zeigen, und müssen daher Testfunktionale betrachten. Wir definieren zur Übersichtlichkeit:

$$\langle \mu, f \rangle := \int f(x) \mu(dx)$$

speziell also:

$$\langle \epsilon_N, f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(X_N^k(t), t)$$

Die schwache Konvergenz von  $\epsilon_N(x, t)$  gegen  $\rho(x, t) \cdot d\lambda(x)$  schreibt sich dann als:

$$\langle \epsilon_N(t), f \rangle \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \langle \rho(t) \cdot d\lambda(x), f \rangle, \quad \forall f \in C_b^0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$$

Die Interaktionsterme lassen sich als Faltung des Gradienten des Interaktionspotentials mit  $\epsilon_N(t)$  schreiben:

$$F_{agg}^N [X_N(t)] (X_N^k) = \frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N \nabla V_1^a (X_N^k - X_N^j) = [\nabla V_1^a * \epsilon_N(t)] (X_N^k(t))$$

$$\begin{aligned} F_{rep}^N [X_N(t)] (X_N^k) &= -\frac{1}{N} \sum_{j \neq k}^N N^\beta \nabla V_1^r (N^{\beta/d} (X_N^k - X_N^j)) \\ &= -[\nabla V_N^{rep} * \epsilon_N(t)] (X_N^k(t)) \end{aligned}$$

SDE:

$$dX_N^k(t) = \{ \alpha [\nabla V_1^a * \epsilon_N(t)] - \gamma [\nabla V_N^{rep} * \epsilon_N(t)] \} (X_N^k(t)) \cdot dt + \sigma_N \cdot dW^k(t)$$

## Exkurs: Itô's Formel

Sei  $X(t)$  ein stochastischer Prozess für den gilt:

$$dX(t) = a(t)dt + b(t)dB_t$$

Für das Differenzial von  $f(X(t), t)$  gilt dann:

$$df = \left[ f_t + a \cdot f_x + \frac{b^2}{2} f_{xx} \right] \cdot dt + b \cdot f_x \cdot dB_t$$

Der zusätzliche Term  $\left\{ \frac{b^2}{2} f_{xx} \cdot dt \right\}$  entstammt der nicht verschwindenden quadratischen Variation des Wiener'schen-Prozesses ( $dB_t^2 \rightarrow dt$ ).

( $\rightarrow$  informelle Herleitung)

## Abkürzungen und Definitionen:

$$\epsilon_N(B, t) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta_t^k(B)$$

$$\langle \epsilon_N, f \rangle := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(X_N^k(t), t)$$

$$[\epsilon_N * \nabla G](X_N^k(t)) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \nabla G(X_N^k(t) - X_N^j(t))$$

## Doob'sche Ungleichung:

Für ein nicht-negatives Martingal  $M(t)$ ,  $t \in [0, T]$  gilt:

$$\|M(T)\|_p \leq \left\| \sup_{0 \leq t \leq T} M(t) \right\|_p \leq \frac{p}{p-1} \|M(T)\|_p$$

Resultat:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) &= \frac{\sigma_\infty^2}{2} \Delta \rho(x, t) + \alpha \Delta \rho(x, t)^2 \\ &\quad - \gamma \nabla \cdot [\rho(x, t) (\nabla V_1^{\text{agg}} * \rho(\cdot, t))(x)], \quad x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0, \\ \rho(x, 0) &= \rho_0(x), \quad x \in \mathbb{R}^d \end{aligned}$$

Weiterhin kann man das erstaunliche Resultat zeigen, dass trotz der starken Interaktion die Positionen der einzelnen Teilchen approximativ unabhängig, identisch verteilt bleiben (sog. *propagation of chaos*)

$\rho(x, t)$  beschreibt also nicht nur die makroskopische Qualität einer Stoffdichte, sondern mikroskopisch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit jedes einzelnen Teilchens, abhängig von Zeit und der Startverteilung.

## Verallgemeinerungen:

Der allgemeinere Ansatz für die SDE:

$$dY_t^\varepsilon = - \left[ \nabla V^\varepsilon * (V^\varepsilon * u^\varepsilon(t))^{m-1} \right] (Y_t^\varepsilon) dt + dB_t$$
$$V^\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon^d} V\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$$

führt für  $\varepsilon \rightarrow 0$  auf:

$$\partial_t u = \frac{1}{2} \Delta u + \frac{m-1}{m} \Delta u^m$$

Neben dem hier vorgestellten Modell spielt die Modellierung Simulation und mit Hilfe interagierender Vielteilchensysteme zunehmend eine wichtigere Rolle in vielen Bereichen der Physik, Biologie und Chemie, aber zunehmend auch in Soziologie und Wirtschaftswissenschaften.

Neben den in unserem Modell vorkommenden Komponenten zeichnen sich diese Modelle oft durch weitere charakteristische Merkmale aus:

- Externe Felder:  $F(x, t) \cdot dt$
- Heterogenität der Partikel:  $X_{N_x, N_{ges}}^k, Y_{N_y, N_{ges}}^l$
- Reaktionsterme, die Änderungen der Teilchenzahlen/eigenschaften bewirken (z.B. *chemische Reaktion*)
- Individuelle, deterministische Dynamik:  $g^k(x, t) \cdot dt$

## Zusammenfassung:

Wir haben gesehen, dass sich empirisch abgeleitete Gesetze makroskopischer Systeme auch aus mikroskopischen Modellen herleiten lassen.

Dabei erfolgt die Modellierung auf mikroskopischer Ebene durch SDE, die die Interaktion der Teilchen untereinander sowie mit der Umgebung simulieren sollen.

Unter geeignet gewählten Voraussetzungen lässt sich der Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  analytisch vollziehen und führt auf eine PDE für die Evolution der räumlichen Teilchendichte.

Mikroskopische Modelle haben lassen sich darüber hinaus unter Verwendung numerischer Verfahren zur Lösung von SDEs direkt simulieren.



Daniela Morale, Vincenzo Capasso, Karl Oelschläger

An interacting particle system modelling aggregation behavior: from individuals to populations,

*J. Mathematical Biology, Volume 50, Number 1, 2005.*



Robert Philipowski

Stochastic Interacting Particle Systems and Nonlinear Partial Differential Equations from Fluid Mechanics,

*Dissertation, Bonn, 2007.*



Robert Philipowski, Alessio Figalli

Convergence to the viscous porous medium equation and propagation of chaos,

*Preprint, 2007.*



Desmond J. Higham

An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations

*SIAM REVIEW Vol. 43, No.3, pp.525–546, 2001*



Friedman, A.:

Stochastic Differential Equations and Application. Vols. I and II

*Academic Press, London, 1975*